高分子混合系の相分離ダイナミクス: Lagrange描像に基づく計算機シミュレーション(ポスター発表,階層性と非線形ダイナミクス:現象論の視座)

AUTHOR(S):

奥薗, 透

高分子混合系の相分離ダイナミクス：Lagrange 描像に基づく計算機シミュレーション

お茶大理　奥薗透

高分子混合系のダイナミクスを記述する現象論的なモデルである二流体モデル [1] に基づいて、Smoothed-Particle Hydrodynamics (SPH) 法 [2] を応用することにより、新たな数値モデルを構築する。ここでは、最初の試みとして、粘弾性効果はいっさい無視する（その取り入れ方については議論する）。シミュレーションは、2次元の系での domain growth kinetics と、shear flow 下での相分離過程に関して行う。

SPH 法は、天体物理学での流体計算でよく用いられている手法である。この方法では、ある与えられた場 $A(\boldsymbol{r})$ に対して、次のような smoothed variable $A_s(\boldsymbol{r})$ が定義される：

$$A_s(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' W(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}', h) A(\boldsymbol{r}') \,. \tag{1}$$

ここで、積分核 $W(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}', h)$ は smoothing function と呼ばれ、位置 $\boldsymbol{r}$ でのサイズ h の流体粒子を定義する。典型的には、W は $W(\boldsymbol{r}, h) \propto \mathrm{e}^{-\boldsymbol{r}^2/h^2}$ のような Gauss 型である。もしも十分な数の点の集合 $\{\boldsymbol{r}_i\}$ $(i = 1, \ldots, N)$ がランダムな位置に流体の密度に比例する確率で与えられるならば、(1) の積分は、モンテカルロ積分法により

$$A_s(\boldsymbol{r}) \simeq \sum_{j=1}^{N} m \frac{A(\boldsymbol{r}_j)}{\rho_j} W(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j, h) \,. \tag{2}$$

ただし、$\rho_j \equiv \rho(\boldsymbol{r}_j)$ は $\boldsymbol{r}_j$ における流体の密度で、実際の数値計算上では、その smoothed variable $\rho_s(\boldsymbol{r}_j)$ で代用される。即ち、

$$\rho_i = \sum_j m W_{ij} \tag{3}$$

ここで、$W_{ij} \equiv W(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j, h)$ である。また、$m \equiv \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\rho(\boldsymbol{r})/N$ は流体粒子の質量である。(1), (2) からわかるように $A_s(\boldsymbol{r})$ は $\boldsymbol{r}$ によって微分可能である。したがって、例えば、密度勾配の $\boldsymbol{r}_i$ での評価 $(\boldsymbol{\nabla}\rho)_i$ は、

$$(\boldsymbol{\nabla}\rho)_i = \sum_j m \boldsymbol{\nabla}_i W_{ij} \tag{4}$$

と表される。ただし、$\boldsymbol{\nabla}_i W_{ij} \equiv \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i} W(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j, h)$ である。このような手続きによって、流体力学的方程式は流体粒子 $\{\boldsymbol{r}_i\}$ の運動方程式に変換される。

今、二流体モデルにおいて、A, B 二種類の流体粒子を考える。二流体モデルによると、流体粒子に働く力は、粘弾性効果を無視すれば、化学ポテンシャルの勾配による熱力学的力と、粘性ストレス、そして二つの流体の速度差に比例する摩擦力である。このことを考慮して、次のように Lagrangian $\mathcal{L}$ と散逸函数 $\mathcal{R}$ を書く：

$$\mathcal{L} = \sum_j m_j \left[\frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{r}}_j^2 - f(\rho_j, \phi_j) \right] \,, \tag{5}$$

$$\mathcal{R} = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \eta \boldsymbol{D}_j : \boldsymbol{D}_j + \frac{1}{2} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \zeta_j (\boldsymbol{v}_A - \boldsymbol{v}_B)_j^2 \,, \tag{6}$$

ここに、m_j および $\dot{\boldsymbol{r}}_j \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{r}_j$ は、それぞれ粒子 j の質量および速度、ϕ_j は $\boldsymbol{r}_j$ における A 流体の質量比、$f(\rho_j, \phi_j)$ は単位質量あたりの自由エネルギー、η は流体の shear viacosity（両方の流体で等しいと仮定）、$\boldsymbol{v}_A$、$\boldsymbol{v}_B$ は、それぞれ A、B 流体の局所的速度、$\boldsymbol{D}_j$ は平均流速 $\boldsymbol{v} \equiv \phi \boldsymbol{v}_A + (1-\phi)\boldsymbol{v}_B$ に関する対称な速度勾配テンソルの traceless part の位置 $\boldsymbol{r}_j$ での評価、ζ_j および $(\boldsymbol{v}_A - \boldsymbol{v}_B)_j$ は、それぞれ $\boldsymbol{r}_j$ での二流体間の摩擦係数および速度差である。（一般に、$\mathcal{L}$ は $\boldsymbol{\nabla}\phi$ を含んだ形に拡張できる。）これらによって、流体粒子 i の運動方程式は、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{r}_i} + \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i} = 0 \tag{7}$$

によって与えられる。これは、二流体モデルのもうひとつの表現である。

参考文献

[1] M. Doi and A. Onuki, J. Phys. II France **2**, 1631 (1992).

[2] J. J. Monaghan, Annu. Rev. Astron. Astrophys. **30**, 543 (1992).